ионам кобальта, связанным с кислородом (вероятно, Co3O4) [1] и другим ионам кобальта, координированным азотом [2]. Пик А (779.7 эВ) в низкоэнергетической области может быть соотнесен с двухвалентным оксидом кобальта CoO. Компонента на 783.5 эВ (пик D) вероятнее всего соответствует связям с карбоксильной группой - Co(CO)₄. Две компоненты (пики Е и F) с энергиями 786.2 эВ и 789.6 эВ являются сателлитами встряски.



рис.1 - Разложение Co2p3/2 XPS спектра нанокомпозита состава CoOx/ПАН (a), NEXAFS спектр за 1s краем углерода нанокомпозита состава CoOx/ПАН в сравнении со спектром «чистого» ПАН (b)

Все упомянутые значения энергий связи находятся в согласии с литературными данными для подобных систем [1,2]. Спектры NEXAFS за К-краем углерода для нанокомпозита CoOx/ПАН и чистого ПАН представлены на рисунке (рис.1 b). Основная спектральная особенность в спектре чистого ПАН – высокоинтенсивный край поглощения на 286.8 эВ, соответствующий $1s \rightarrow \pi^*C \equiv N$. Интенсивность данного пика в спектре нанокомпозита CoOx/ПАН значительно ниже в связи с преобразованием тройной связи C=N в двойную C=N либо ординарную C-N. Данный вывод также подтверждается отсутствием в спектре нанокомпозита пика на 306 эВ, связанного с C $1s \rightarrow \sigma^*C \equiv N$, а также наличием широкого пика на 301 эВ, объясняемого C $1s \rightarrow \sigma^*C=N$ переходами. Пики на 288.5 эВ, 292.6 эВ связаны с различными C $1s \rightarrow \sigma^*$ переходами. Кроме того, в спектре нанокомпозита присутствует новая особенность на 285 эВ, связанная с ненасыщенностью в основной цепи полимера [3].

Работа выполнена при поддержке внутреннего гранта ЮФУ № ВнГр-07/2017-30.

Список публикаций:

[1] Artyushkova K., Levendosky S., Atanasov P., Fulghum Ju. // Top Catal (2007) V.46, pp.263 – 275.

[2] Roncaroli F., Dal Molin E. S., Viva F. A., Bruno M. M., Halac E.B. // Electrochimica Acta. - 2015. - V. 174. - P. 66 - 77.

[3] Harald D. H. Sto"ver, Adam P. Hitchcock and Tolek Tyliszczak // Journal of Synchrotron Radiation (2007). 14, 181–190.

Электрические свойства твердых растворов на основе диарсенида кадмия при высоких давлениях

Чубарешко Екатерина Сергеевна

Тебеньков Александр Владимирович, Вершинина Екатерина Алексеевна

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Бабушкин Алексей Николаевич, д.ф.-м.н.

ek.chubareshko@yandex.ru

Полупроводниковые соединения группы A^{II}B^V, а также твердые растворы на их основе используются для создания приборов и элементов для лазерной и оптоэлектронной техники. Изучение физических свойств указанных соединений необходимо для изготовления и улучшения электронной техники, а также позволяет расширить диапазон их практического применения.

В работах [1,2] исследовались электрические свойства $CdAs_2$ и $Cd_{1-x}Zn_xAs_2$ в области давлений до 10 ГПа. Авторы обнаружили, что добавление цинка в диарсенид кадмия при давлениях до 10 ГПа приводит к тому, что концентрация носителей в твердых растворах увеличивается, Zn укрепляет структуру CdAs₂, занимая вакантные места в комплексах As-As. В CdAs₂ обнаружен фазовый переход при давлении 5.5 ГПа. В твердых растворах $Cd_{0.97}Zn_{0.03}As_2$, $Cd_{0.95}Zn_{0.05}As_2$ в исследуемой области давлений аномалий в барической зависимости электросопротивления не обнаружено. В области давлений выше 10 ГПа электрические свойства данных растворов не изучены. Нами были проведены исследования электрических свойств твердого раствора

 $Cd_{1-x}Zn_xAs_2$, где x = 0 ат. %; 0.03 ат. %; 0.05 ат. % при высоких давлениях от 16 ГПа до 50 ГПа. Целью наших исследований было узнать влияние концентрации цинка на смещение давлений возможных фазовых переходов в область больших давлений.

Было измерено электросопротивление твердых растворов $Cd_{1-x}Zn_xAs_2$, где x = 0 ат. %; 0.03 ат. %; 0.05 ат. % при давлениях от 16 ГПа до 50 ГПа. Измерения проводились при увеличении, а затем уменьшении давления при комнатной температуре. Для генерации давлений использовали камеру высокого давления с наковальнями типа «закруглённый конус - плоскость» из искусственных поликристаллических алмазов "карбонадо". Эти алмазы – хорошие проводники электрического тока, что позволяет измерять барические и температурные зависимости сопротивления образца, помещенного между наковальнями, используя их в качестве контактов [3].

В ходе эксперимента получены данные о временной зависимости электросопротивления при различных фиксированных давлениях. В результате были определены характерные времена релаксации электросопротивления в изученном диапазоне давлений. По характеру изменения времени релаксации можно судить о возможных структурных изменениях образца. На *рис. 1* показаны области нестабильности кристаллической решетки, которые указывают на структурные изменения твердых растворов $Cd_{1-x}Zn_xAs_2$, где x = 0 ат. %; 0.03 ат. %; 0.05 ат. %.



рис. 1 Барические области изменений электрических свойств соединений Cd_{1-x}Zn_xAs₂

При первом цикле нагружения в диарсениде кадмия в области (30 ± 1) ГПа наблюдаются структурные изменения. Дальнейшее циклирование приводит к смещению области перехода до 25 ГПа. В твердом растворе $Cd_{0.97}Zn_{0.03}As_2$ изменения происходят в области 30 ГПа и дальнейшее циклирование не приводит к заметному смещению области структурных изменений, область фазового перехода сохраняет свое положение. При увеличении содержания цинка до 0.05 ат. % наблюдаемый фазовый переход в области 30 ГПа становится менее выраженным, а при давлениях выше 48 ГПа наблюдается новая область структурных изменений.

Легирование диарсенида кадмия цинком приводит к упрочнению решетки и увеличению области давлений структурных изменений. Из полученных нами данных для соединения с концентрацией цинка x = 0.05 ат. % нельзя точно выделить границы фазового перехода в области 25 - 35 ГПа. Данное соединение демонстрирует новый фазовый переход при давлениях выше 48 ГПа. Мы предполагаем, что такая концентрация цинка приводит к более серьезным изменениям, чем просто занимание вакантных мест в комплексах As-As.

Список публикаций:

[1] Моллаев А.Ю. и др. // Физика и техника полупроводников. 2009. Т. 43. вып. 6. С. 730-734. [2] Mollaev A. Yu. et al. // Inorganic Materials. 2003. Vol. 39. No. 8. P. 780–782.

[3] Яковлев Е.Н., Степанов Г.Н., Бибаев, К.Х. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1972. Т. 16. № 4. С. 240–242.

Колебательный спектр VIII, IV, II и XI фаз льда Шайкомалова Елена Сергеевна Кемеровский государственный университет Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н. <u>L6930@mail.ru</u>

Помимо того, что лед является ключевым компонентом земной коры и мантии, на ее поверхности и в атмосфере он играет решающую роль в круговороте воды и определении климата. В связи с этим лед привлекает большой научный интерес и является одной из самых активно изучаемых конденсированных сред [1]. Однако, в отличие от льда Ih, хорошо изученного и широко распространенного на нашей планете, существуют и другие фазы, исследование которых важно для астрофизики, в частности при анализе ледяных гигантов, примерами которых в нашей Солнечной системе являются Уран и Нептун. Проведение экспериментов затрудняется необходимостью работы в области низких температур и высоких давлений, с чем помогают справиться современные методы компьютерного моделирования.